

## 目次

はじめに	1
組織とメンバー:2024年度	2
先端エネルギー材料研究紹介	
・計算科学・情報科学による先端エネルギー材料研究への貢献	3
・放射光顕微分光イメージングとデータ科学の連携で拓くエネルギー材料研究	4
・グリーン水素製造のための固体酸化物セル(SOC)材料の開発	5
イベント	
先端エネルギー材料理工共創センター2023 ワークショップ	6
お知らせ	
若手研究者のための革新的エネルギー材料・複合モジュール創製研究助成	7

## はじめに

2015年4月に発足した先端エネルギー材料理工共創研究センター(通称:E-IMRセンター)の活動も2024年度で9年目を迎えます。E-IMRセンターの第1期では、理学と工学とを融合した「理工共創」の研究を協力推進することにより、スピン、電子、イオン、ホール、フォトン等の多様なキャリアを原子レベルで制御した先端エネルギー材料の創成に取り組んできました。

しかし、昨今のエネルギー問題と地球温暖化・気候変動問題は、その課題解決の重要性がさらに高まり、新たなエネルギー源の確保の仕組み、エネルギー変換・貯蓄材料の研究開発が急務となっております。そこで、第4期中期目標・中期計画が始まる2022年度から、E-IMRセンターの第2期として、組織の拡充・強化を図り、太陽エネルギーの利用と3つの「蓄」の最大化に貢献する革新的エネルギー材料と複合モジュール創製に向けた4つの研究ユニット体制(1. 太陽エネルギー変換材料研究ユニット、2. 蓄エネルギー材料研究ユニット、3. 材料評価解析研究ユニット、4. 複合モジュール・社会実装研究ユニット)に再編し、本センターの方向性の基軸をグリーンエネルギーテクノロジーの開拓にシフトしました。

第1期でのユニット編成では、主に物理現象や化学現象に立脚した分類に基づいておりましたが、第2期のユニット編成では、より分類を大きくし、新たに材料評価解析研究のユニットを設けました。このユニットでは、特に、放射光や中性子などを利用した量子ビーム解析や、第一原理計算はもとより、マテリアルインフォマティクスを利用した材料評価予測なども行える

チーム編成となっております。

理学系および工学系研究者によって構成された各研究ユニットでは、エネルギー材料分野での研究フロンティアを開拓して世界最高水準の材料研究を推進するとともに、異分野融合に関する高度な研究能力をもつ若手人材の育成として3名の特任助教を採用しております。また、本学工学研究科や材料科学高等研究所、国際放射光イノベーションセンター(SRIS)等をはじめとする学内外研究組織の教員・研究者に参画(頭脳循環)して頂き、これまで金研でカバーしていない領域の研究を進めております。

特に2023年度は、これまでになく、E-IMRセンターのメンバーを代表とする大きなプロジェクトが開始した年でもあります。JSPS科学研究費助成では、テーマ名称は省略しますが、特別推進研究に高橋教授が、基盤研究(S)に市坪教授が新たに採択されました。また、JST-GtcXプロジェクトから、蓄電池領域および水素領域から市坪教授および折茂教授の2件の研究提案が採択され、JST-ALCA NEXTから岡本准教授の研究提案が採択されました。また、継続中のプロジェクトとしては、藤田教授の基盤研究(S)、加藤教授、藤原教授の基盤研究(A)、塚崎教授のJST-CREST研究が遂行中です。

以上のようにユニット編成やメンバー構成を新たにし、グリーンエネルギーテクノロジーに貢献すべく研鑽を積んでおります。カーボンニュートラルに向けた太陽エネルギー利用グリーンエネルギー社会の構築に貢献します。

# 組織とメンバー:2024年度

先端エネルギー材料理工共創研究センターは、東北大学金属材料研究所を実施部局として材料科学高等研究所、大学院工学研究科、国際放射光イノベーション・スマート研究センターの参画を得て、理学系研究者と工学系研究者が連携する研究体制を構築しています。本センターは、太陽エネルギー変換材料研究ユニット、蓄エネルギー変換材料研究ユニット、材料評価・解析研究ユニット、複合モジュール・社会実装研究ユニットで組織

されています。ユニット内での研究のみならず、ユニットを超えた研究も展開しています。各ユニットでは国内外大学・研究機関所属研究者を研究戦略室メンバーとして迎えて意見交換を行い、最新の研究動向を踏まえた先端エネルギー材料・複合モジュール創製の研究を実施しています。

## センター長/教授

市坪 哲

蓄電池創製  
相変態構造制御  
統計熱力学組織形成論



## <運営委員長>

所内規程により設置

## <研究戦略室>

センター長、ユニット長、国内外研究者(非公開)により構成

## <研究支援室>

4月着任予定  
研究企画・運営担当

## 太陽エネルギー変換材料研究ユニット

### 教授

藤原 航三

結晶成長  
Si多結晶太陽電池



### 教授(委嘱)

塚崎 敦

超伝導薄膜  
界面物性  
トポロジカル物性・物質



### 教授(兼)

Bauer, Gerrit  
Ernst-Wilhelm

物性理論物理  
スピントロニクス  
(材料科学高等研究所)



### 准教授(兼)

岡本 範彦

透過電子顕微鏡  
熱電材料



### 助教(兼)

前田 健作

結晶成長  
Si多結晶の成長メカニズム



### 助教(兼)

伊藤 啓太

強磁性窒化物  
規則合金



### 特任助教

野澤 純

コロイド  
結晶成長



## 蓄エネルギー変換材料研究ユニット

### 教授(兼)

宮坂 等

酸化還元活性錯体格子  
多機能型ソフトマテリアル  
機能協奏型二次電池



### 教授(兼)

折茂 慎一

高密度水素貯蔵材料  
超イオン伝導材料  
多価蓄電デバイス  
(材料科学高等研究所)



### 教授(兼)

高村 仁

固体酸化物燃料電池  
プロトン伝導性セラミックス  
水素製造システム  
(工学研究所)



### 特任助教

李 弘毅

デュアルカチオン電池  
金属・合金負極材料開発



## 材料評価・解析研究ユニット

### 教授(兼)

藤田 全基

量子ビーム  
教相関電子系  
結晶成長



### 教授(兼)

熊谷 悠

計算材料学  
マテリアルズインフォマ  
ティクスセラミックス



### 教授(兼)

高橋 幸生

放射光  
コヒーレント回折イメージング  
微細構造・化学状態解析  
(国際放射光イノベーション・  
スマートセンター)



### 准教授

Belosludov,  
Rodion V.

機能性ナノポーラス材料  
ガス貯蔵・分離



### 助教(兼)

河口 智也

Li/多価蓄電池正極材料  
放射光X線散乱・分光解析



## 複合モジュール・社会実装研究ユニット

### 教授(兼)

加藤 秀実

ナノポーラス金属・半金属  
金属ガラス・アモルファス合金



### 教授/センター長

市坪 哲

蓄電池創製  
相変態構造制御  
統計熱力学組織形成論



### 特任助教

宋 瑞瑞

脱成分(デアロイング)  
多孔質金属/合金  
触媒



# 先端エネルギー材料研究紹介1

## 計算科学・情報科学による先端エネルギー材料研究への貢献

熊谷 悠 教授  
材料評価・解析研究 研究ユニット  
金属材料研究所複合機能材料学研究部門

2022年度から、材料評価・解析研究ユニットに所属する事となりました熊谷です。私の研究では、セラミック材料を対象に、「第一原理計算」と呼ばれる、量子力学の基本方程式を数値的に解く手法を用いています。この手法を使うことで、材料の傾向や特性を計算だけで理解することができ、さらに実験に先駆けて新しい材料を探索することが可能となります。

私たちが特に注力している研究領域の一つは、格子欠陥に関するものです。セラミックス内部には、空孔や粒界、転位などの様々な格子欠陥が存在し、これらは材料の特性に良くも悪くも影響を与えます。これらの欠陥を正確に理解し、制御することは、材料の性能向上や新しい材料の開発において不可欠です。私たちは、これらの格子欠陥に特化した第一原理計算手法や計算プログラムを開発し、実際の材料に適用しています。たとえば、最近では、リン化ナトリウム(NaP)が太陽電池の材料として有望であると提案し、点欠陥の計算を通じてその効率化の方法を探求しています。この物質は実験研究

者との連携により合成に成功し、計算結果との良好な一致を確認しています(図1)。

もう一つの主要な研究方向は、多くの物質に対する第一原理計算を行い、得られた物性データをデータベース化することです。これらの大量の計算データは、機械学習の訓練データとして利用可能であり、多くの候補の中から有望な物質を見つけるのにも役立ちます。例えば、最近我々は約1000種類の酸化物セラミックス中の酸素空孔について第一原理計算を行い、得られたデータを基に酸素空孔の形成エネルギーに関する機械学習や、新しいp型透明導電膜(TCO)の探索を行っています(図2)。

私たちの研究は、従来のセラミック材料だけでなく、二次元物質やリチウムイオン電池など、幅広い分野への広がりを見せています。今後も、「セラミック材料」×「計算科学・情報科学」により、先端エネルギー材料研究に貢献してまいります。

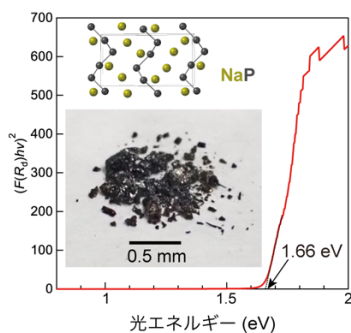


図1 NaPのサンプルと光吸収スペクトル

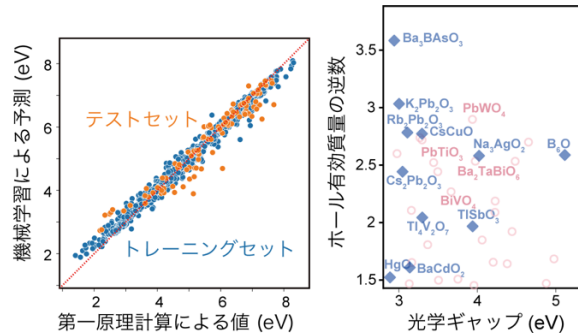


図2 (左)酸素空孔形成エネルギーの機械学習と(右)p型TCOの探索

<参考> 熊谷教授の研究詳細はホームページをご覧ください。  
<https://kumagailab.imr.tohoku.ac.jp/>

## 先端エネルギー材料研究紹介2

# 放射光顕微分光イメージングとデータ科学の連携で拓く先端エネルギー材料研究

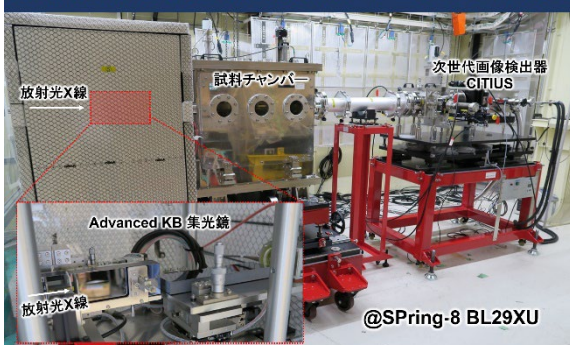
高橋 幸生 教授  
材料評価・解析研究 研究ユニット  
国際放射光イノベーション・スマート研究センター

2022年度より、材料評価・解析研究ユニットのメンバーとして参画しております。本センターでは、先端的な放射光顕微分光イメージング技術の開発と、それを用いたエネルギー材料の解析に関する応用研究を推進しております。エネルギー材料の多くは、様々なプロセッシングを経て形成され、原子(マイクロ)からミリメートル(マクロ)までの空間階層構造を有する不均一・複雑系です。新材料を設計・開発する際、マイクロとマクロを繋ぐメソスケールでの微細構造と機能の相関を解明することが重要です。放射光を光源とする顕微分光イメージング技術を駆使することでエネルギー材料の構造・元素・電子状態を多角的に解析することができます。特に、放射光の可干渉性(コヒーレンス)を活用したタイコグラフィは、X線領域で未踏であったナノスケールでの微細構造と化学状態の可視化が可能な次世代の顕微分光イメージング法として注目されています。これまで、大型放射光施設SPring-8において、先端的なX線光学技術を備えた高分解能・高感度タイコグラフィ装置の開発し、触媒・電池材料の解析に応用してきました。また、データ科学的なアプローチによって、3次元空間に複雑に分布する元素・電子状態の情報から構造-機能相関に関する特徴

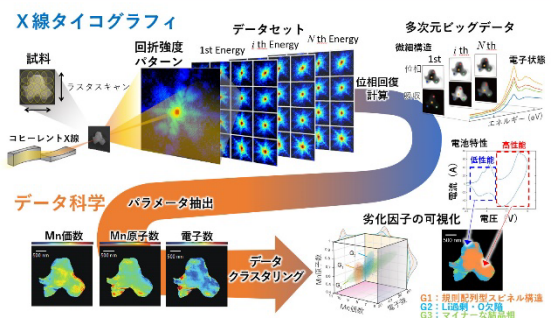
的な情報を抽出することにも取り組んで参りました。

東北大学青葉山新キャンパスにおいて現在整備中の3GeV高輝度放射光施設NanoTerasuの運用が2024年度より開始される予定です。低エミッタンス光源であるNanoTerasuの放射光は、低エネルギー領域での輝度が現状のSPring-8より大幅に向上します。したがって、軟X線やテンダーX線のエネルギー領域に吸収端を持つ元素の化学状態イメージングでタイコグラフィが威力を発揮します。SPring-8では、数mmの観察視野を維持しつつ、10 nm程度の空間分解能を有する二次元投影像を取得するのに、数時間の測定時間を要していましたが、NanoTerasuでは測定時間が大幅に短縮されるでしょう。測定の高スループット化に伴い、データ解析の高速化も要求されます。現状では、像再生までは半自動で行えますが、その先にある構造-機能相関の解析は人の感に頼るところが多いです。タイコグラフィによるイメージングとデータ科学的アプローチの連携による構造-機能相関解析が、エネルギー材料分野における課題解決ツールとするべく、当ユニットで研究を進めて参ります。

### 先端的X線光学技術を備えたタイコグラフィ装置



### 放射光顕微分光イメージング計測×データ科学



〈参考〉 高橋教授の研究詳細はホームページをご覧ください。  
<https://www2.tagen.tohoku.ac.jp/lab/takahashi-y/html/index.html>

## グリーン水素製造のための固体酸化物セル (SOC)材料の開発

高村 仁 教授  
蓄エネルギー変換材料研究ユニット  
工学研究科

2050年のカーボンニュートラル実現のために水素の有効活用、特にグリーン水素の効率的製造技術に注目が集まっています。国外でも米国DOE関連のHydrogen Shot “1 1 1”プロジェクト(1kgの水素を1ドルで1ディケード(10年)以内に製造する技術を開発)に代表されるように、精力的な研究開発が行われています。グリーン電力を活用した水電解としてはアルカリ型や高分子膜を利用する技術開発が先行していますが、酸化物系固体電解質を用いた固体酸化物電解セル(Solid Oxide Electrolysis Cell; SOEC)が原理的に最も高い効率を示し、次世代の水素製造技術として期待されています。このSOECは、エネファームType-Sとして実用化されている固体酸化物形燃料電池(Solid Oxide Fuel Cell; SOFC)の逆作動であり、構成材料としては類似の固体電解質・電極材料を用いるものの、動作条件の違いにより、異なる劣化耐性や材料特性の要求があります。我々の研究グループでは、この固体酸化物セル(SOC)と総称されるシステムへの応用を指向した材料開発を行っています。

その一例として、酸化物中のキャリアが $H^+$ であるセラミックス、すなわちプロトン伝導体に関する最近の研究を紹介します。酸化物中へのプロトン導入は温度・雰囲気依存して酸素空孔・電子正孔生成と競合するプロセスであり、これら欠陥の安定性を理解することは、高い水合度と移動度を有するプロトン伝導体を開発するために重要です。そこで、典型的なプロトン伝導体である

Sc置換 $BaZrO_3$ の中のプロトンの安定性や存在状態を第一原理計算と固体NMRにより解析しました。このSc置換 $BaZrO_3$ において水和反応に寄与する2配位の酸素空孔は図1(a)に示すように3種類( $Zr-V_O^{\bullet\bullet}-Zr$ 、 $Zr-V_O^{\bullet\bullet}-Sc$ 、 $Sc-V_O^{\bullet\bullet}-Sc$ )に分類されます。ここで、水和レベルを徐々に変化させると(図1(b))、最初に水和される酸素空孔( $Zr-V_O^{\bullet\bullet}-Zr$ )の水和エネルギーは $-1.13$  eVと大きく、最終段階で水和される酸素空孔( $Sc-V_O^{\bullet\bullet}-Sc$ )では $-0.71$  eVと減少しました。すなわち、 $Zr-V_O^{\bullet\bullet}-Zr$ が最も水和されやすいと言えます。これは負に帯電するアクセプター正に帯電する酸素空孔が静電相互作用により会合することでその酸素空孔をより安定化しているためと理解されます。この描像は固体NMRにより実験的にも確認できます。図2に10 mol%Sc置換 $BaZrO_3$ において4.2 mol%のプロトン量(42%の水和レベル)とした場合の $^{45}Sc$  MAS NMRスペクトルを示します。プロトンがSc周囲に配位した $ScO_5(OH)$ が確認されますが、多くは $ScO_6$ であり、その量比関係から、この初期の水和状態ではZr周囲に優先的にプロトンが配位すると理解されました。この他にも、混合導電性電極材料の開発も進めています。

本学にはこのSOC技術に関する研究者が集結しており、基礎から応用展開まで一貫した研究開発が行われています。今後、さらにE-IMRの枠組みを活用して、SOCに関する材料開発を進めていきます。

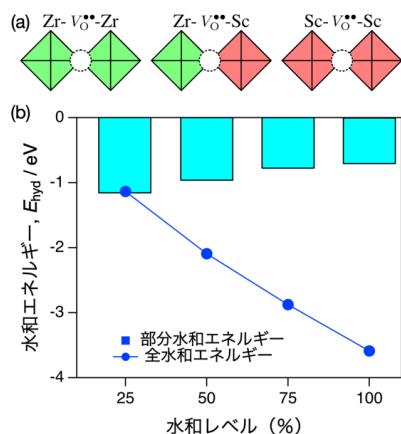


図1 (a)Sc置換 $BaZrO_3$ の欠陥配置と(b)水和エネルギー

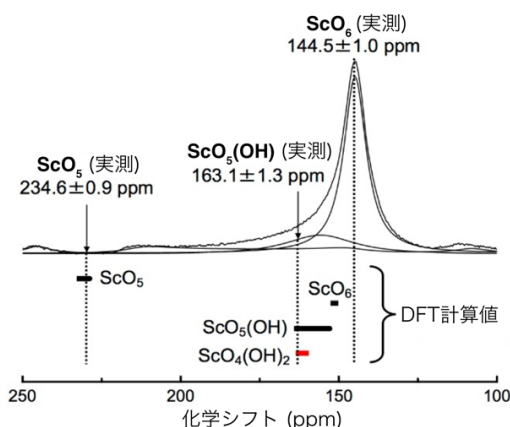


図2 Sc置換 $BaZrO_3$ の $^{45}Sc$  MAS NMR

# イベント

## 先端エネルギー材料理工共創研究センター 2023 ワークショップ

開催日：2023年12月26日（火）13:00 - 17:15

開催場所：東北大学金属材料研究所 講堂、オンラインとのハイブリッド開催

2023年12月26日（火）に金属材料研究所講堂においてワークショップを開催しました。今回は、Zoom Webinar によるオンライン配信と東北大学関係者の会場参加によるハイブリッド方式で行いました。招待講演1では、文部科学省研究復興局参事官(ナノテクノロジー・物質・材料担当)宅間 裕子様より「マテリアル革新力強化戦略に基づくマテリアルDXプラットフォームの実現について」と題するご講演を、招待講演2では、日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター長高梨 弘毅 教授より「JAEA先端基礎研究センターにおけるスピン熱電材料の研究」と題するご講演をいただきました。また、研究紹介として、大阪公立大学電固電池研究所長林 晃敏教授より「大阪公立大学における全固体電池の研究開発」と題

するご講演をいただきました。センターの研究紹介では、太陽エネルギー変換材料研究ユニット長藤原航三教授、国際放射光イノベーション・スマートセンター高橋幸生教授をはじめ、4つの研究ユニットから研究者が発表を行いました。令和5（2023）年度若手研究者のための革新的エネルギー材料・複合モジュール創製研究助成採択者の、金属材料研究所・谷村洋助教、金属材料研究所・芳野遼助教研究発表をいただきました。

活発な質疑応答を通じて2050年のカーボンニュートラル、脱炭素社会の実現に向けた今後のエネルギー材料研究の方向性や、所内間・学内間・大学間、産業界、自治体等との連携に関する議論を深めることができました。



金属材料研究所長  
佐々木 孝彦 教授



E-IMRセンター長  
市坪 哲 教授



文部科学省研究復興局参事官  
(ナノテクノロジー・物質・材料担当)  
宅間 裕子様



日本原子力研究開発機構  
先端基礎研究センター長  
高梨 弘毅 教授



大阪公立大学全固体電池研究所長  
/大学院工学研究科  
林 晃敏 教授



金属材料研究所  
谷村 洋 助教



金属材料研究所  
芳野 遼 助教

## お知らせ

令和6（2024）年度

「若手研究者のための革新的エネルギー材料・複合モジュール創製研究助成」

先端エネルギー材料理工共創研究センターでは、「令和6（2024）年度若手研究者のための革新的エネルギー材料・複合モジュール創製研究助成」の実施を予定しています。

近日中に募集要項を先端エネルギー材料理工共創研究センターのホームページ（<http://www.e-imr.imr.tohoku.ac.jp/>）にて、ご案内する予定です。応募への検討をお願いいたします。